por exemplo $\{1, x, x^2, x^3, \ldots\}$ é l.i. se, para a combinação linear seguinte se anular,

$$A_0 + A_1 x + A_2 x^2 + A_3 x^3 + \ldots = 0$$

devemos ter necessariamente todos os coeficientes nulos,

$$A_0 = A_1 = A_2 = A_3 = \ldots = 0\,.$$

É bom lembrar também que qualquer subconjunto de um conjunto l.i. é também l.i..

Voltando à expressão acima (1.3), onde aparecem quatro somatórias, vemos que todas envolvem potências de x. Imagine que possamos reagrupar esses termos, na forma de potências crescentes; a potência mais baixa de x será x^k, pois o valor menor possível para i (em todas as somas) é zero, e assim temos algo como

$$A_k x^k + A_{k+1} x^{k+1} + A_{k+2} x^{k+2} + \ldots = 0$$

e já sabemos que, devido à independência linear das potências de x, os coeficientes A_k, A_{k+1}, ...serão todos nulos.

Vamos observar, agora, mais atentamente um outro aspecto da equação (1.3). Nas somatórias primeira, segunda, e quarta temos termos gerais envolvendo a potência x^{k+i} onde $i = 0, 1, 2, \ldots$, portanto temos potências como x^k, x^{k+1}, x^{k+2}, etc. Mas, na terceira somatória, o termo geral é diferente, e a menor potência ali é x^{k+2}. Em outras palavras: se quisermos descobrir o coeficiente A_k, devemos descobrir as contribuições que vem da primeira, segunda e quarta somatórias, o mesmo para A_{k+1}. Mas para determinar A_{k+2} e seguintes, devemos considerar as contribuições de todas as quatro somas. É o que faremos a seguir.

Perguntamos: qual a potência mais baixa de x presente na expressão (1.3)? Isto já sabemos, é x^k. A próxima pergunta é: quais os termos de (1.3) que envolvem x^k? Ou, se quiser, qual o coeficiente de x^k na expressão (1.3), reagrupando a série em potências crescentes de x? Vejamos, há contribuições da primeira, segunda e quarta somatórias, sendo que a potência mais baixa é conseguida fazendo $i = 0$:

$$A_k = a_0(k+0)(k+0-1) + a_0(k+0) - n^2 a_0 = 0\,.$$

Observe que a terceira somatória em (1.3) não contribuiu para esse A_k, pois envolve potências a partir de x^{k+2}.

Podemos simplificar essa expressão para A_k,

$$A_k = a_0(k^2 - n^2) = 0$$

e obtemos a primeira equação indicial.

Uma segunda equação indicial é obtida de modo semelhante, agora para o coeficiente de x^{k+1},

$$A_{k+1} = a_1(k+1)(k+1-1) + a_1(k+1) - n^2 a_1 = 0$$

ou

$$A_{k+1} = a_1[(k+1)^2 - n^2] = 0\,.$$

Antes de prosseguir com os A_{k+2} e outros, vamos ver que condições podemos tirar das duas equações indiciais. Da primeira, descobrimos que $k = +n$ ou $k = -n$. Suporemos, sempre, que $a_0 \neq 0$. Quando analisamos a segunda equação indicial, vemos que nem $k = +n$ ou $k = -n$ são soluções dela e, evidentemente, se escolhessemos $k = n-1$, esse valor não é compatível com a primeira equação indicial. Portanto escolhemos $a_1 = 0$. Em resumo, há duas possibilidades: (i) $a_0 \neq 0$, $k = +n$, $a_1 = 0$, e (ii) $a_0 \neq 0$, $k = -n$, $a_1 = 0$.

Na verdade, há mais duas possibilidades, muito particulares: as duas equações indiciais estariam simultaneamente satisfeitas se $k = \pm n = \pm 1/2$, mas não levaremos em consideração isso aqui, porque em física normalmente desejamos que n seja inteiro.

A seguir tentaremos descobrir quanto vale A_{k+j}, com $j \geq 2$. Esses seriam os coeficientes de x^{k+2} e potências superiores, e assim teremos de considerar todas as quatro somatórias da expressão (1.3).

Fazemos, apenas na terceira somatória, a mudança de índice $k+i+2 = k+j$, ou seja, $i+2 = j$, de modo que $i = j-2$. Isto terá o seguinte efeito sobre a terceira somatória:

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i\, x^{k+i+2} = \sum_{j=2}^{\infty} a_{j-2} x^{k+j}\,.$$

E, na primeira, segunda e quarta somatórias, fazemos a troca simples de índice $i = j$. Ficamos com:

$$\sum_{j=2}^{\infty}(k+j-1)(k+j)\, a_j\, x^{k+j} + \sum_{j=2}^{\infty}(k+j)\, a_j\, x^{k+j} +$$

$$+ \sum_{j=2}^{\infty} a_{j-2}\, x^{k+j} - n^2 \sum_{j=2}^{\infty} a_j\, x^{k+j} = 0\,.$$

Você pode estar se perguntando, por quê j estaria começando de 2 na primeira, segunda e quarta somatórias? O motivo é que os casos de $i = 0$ e $i = 1$ já foram tratados, e levam a coeficientes A_k e A_{k+1} que se anulam: são as duas equações indiciais que já analisamos.

Mas, agora, as quatro somatórias podem ser escritas de modo mais econômico,

$$\sum_{j=2}^{\infty} \left\{ (k+j-1)(k+j)\, a_j + (k+j)\, a_j + a_{j-2} - n^2 a_j \right\} x^{k+j} = 0$$

e, em vista da independência linear do conjunto $\{x^{k+2}, x^{k+3}, x^{k+4}, \ldots\}$, os coeficientes são nulos, o que fornece:

$$A_{k+j} = (k+j-1)(k+j)\, a_j + (k+j)\, a_j + a_{j-2} - n^2 a_j = 0\,.$$

Desta última equação, obtemos:

$$a_j = \frac{-1}{(k+j)^2 - n^2}\, a_{j-2} \qquad (j \geq 2)$$

e esta é chamada de <u>relação de recorrência</u>.

Note, nos dois casos possíveis (i) e (ii) já referidos, que $a_1 = 0$. Usemos então a relação de recorrência para $j = 3$:

$$a_3 = \frac{-1}{(k+3)^2 - n^2}\, \underbrace{a_{3-2}}_{a_1=0} = 0$$

e assim a_3 se anula porque a_1 é nulo. Do mesmo modo, se calcularmos a_5, ele será proporcional a a_3; mas $a_3 = 0$ logo $a_5 = 0$ também. Você já deve ter percebido que, usando a relação de recorrência várias vezes (aliás, daí vem o nome "recorrência", você recorre a ela repetidamente), acharemos que todos os coeficientes de índice ímpar se anulam,

$$a_1 = a_3 = a_5 = \ldots = 0\,.$$

Para achar os coeficientes pares, devemos considerar separadamente os casos de $k = \pm n$.

(i) Caso $a_0 \neq 0$, $k = +n$, $a_1 = 0$

Colocando $j = 2$ na relação de recorrência, vem:

$$a_2 = \frac{-1}{(n+2)^2 - n^2}\, a_0 = \frac{-1}{2\,(2+2n)}\, a_0\,;$$

com $j = 4$,

$$\begin{aligned} a_4 &= \frac{-1}{(n+4)^2 - n^2}\, a_2 = \frac{-1}{4\,(4+2n)}\, \frac{-1}{2\,(2+2n)}\, a_0 \\ &= \frac{(-1)^2}{4\,2\,(4+2n)\,(2+2n)}\, a_0\,. \end{aligned}$$

Podemos prosseguir, achando as expressões para $j = 6, 8, 10, \ldots$, mas podemos tentar desde já escrever o termo geral,

$$a_{2j} = \frac{(-1)^j}{[2j\,(2j-2)\,\ldots 2]\,[(2j+2n)\,\ldots (2+2n)]}\, a_0$$

ou, como aprenderemos em aula posterior (não se preocupe se lhe parecer estranho neste momento)

$$a_{2j} = \frac{(-1)^j\,(2n)!!\,a_0}{(2j)!!\,(2j+2n)!!}$$

para $j = 1, 2, \ldots$ O fatorial duplo envolve a multiplicação de números que decrescem de duas unidades, por exemplo $6!! = 6.4.2 = 48$.

Finalmente,

$$\begin{aligned} y(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_{2j}\, x^{2j+n} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j\,(2n)!!\,a_0}{(2j)!!\,(2j+2n)!!}\, x^{2j+n} \\ &= J_n(x) \end{aligned}$$

e é exatamente essa a expressão para a função de Bessel de primeira espécie, $J_n(x)$, que veremos com detalhes na sexta aula.

(ii) Caso $a_0 \neq 0$, $k = -n$, $a_1 = 0$

De modo completamente similar, acha-se

$$\begin{aligned} y(x) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_{2j}\, x^{2j-n} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j\,(-2n)!!\,a_0}{(2j)!!\,(2j-2n)!!}\, x^{2j-n} \\ &= J_{-n}(x) \end{aligned}$$

Exemplo Vamos ver agora a aplicação do método de Frobenius a um caso em que não vale o Teorema de Fuchs, e como veremos a técnica não vai funcionar bem. A equação diferencial a ser abordada é:

$$\ddot{y} + \frac{1}{x^2}\,\dot{y} - \frac{a^2}{x^2}\,y = 0\,,$$

e vemos que $x = 0$ é um ponto singular essencial. Se, de qualquer forma, insistirmos em buscar a solução na forma de série de potências, vamos chegar à equação indicial:

$$k = 0$$

e à relação de recorrência

$$a_{j+1} = \frac{j(j-1) - a^2}{j+1}\,a_j\,.$$

Entretanto, vemos daí que

$$\left|\frac{a_{j+1}}{a_j}\right| \longrightarrow 1$$

logo a série não converge.

Exemplo Considere a equação diferencial

$$\ddot{y} - \frac{6}{x^2}\,y = 0\,.$$

Tentamos, como sempre, a solução

$$y(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i\,x^{k+i}\,,$$

obtemos a sua derivada segunda, substituímos na equação diferencial, para obter:

$$\sum_{i=0}^{\infty}(k+i-1)(k+i)\,a_i\,x^{k+i-2} - 6\sum_{i=0}^{\infty} a_i\,x^{k+i-2} = 0$$

Para a potência mais baixa de x (correspondendo a $i = 0$), obtemos a equação indicial:

$$[k(k-1) - 6]a_0 = 0$$

de onde se acha, se $a_0 \neq 0$, $k = -2$ ou $k = 3$.

Para $i > 0$, acha-se relações como:

$$[(k+1)k - 6]a_1 = 0 \Longrightarrow a_1 = 0\,,$$

$$[(k+2)(k+1) - 6]a_2 = 0 \Longrightarrow a_2 = 0\,,$$

e assim por diante, ou seja,

$$y(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i\, x^{k+i} \underbrace{=}_{a_1=a_2=\ldots=0} a_0 x^k = \begin{cases} a_0 x^{-2} \\ a_0 x^3 \end{cases}$$

Surpreendentemente, encontramos neste exemplo, por Frobenius, duas soluções *exatas* e l.i. da equação diferencial.

ATIVIDADES

1. Classifique as equações diferenciais seguintes:

   (i) $(\ddot{y})^2 - 2xy = 0$

   (ii) $x^2\ddot{y} + x\dot{y} + (x^2 - n^2)y = 0$

   (iii) $x^2\dot{y} - 2x(y-1) = 0$

2. Resolva a equação diferencial

$$5\dot{y} - 2y = 4\,.$$

3. Que solução da equação diferencial do problema anterior satisfaz a condição inicial $y(0) = 1$?

4. Resolva as equações diferenciais:

   (i) $\ddot{y} - 2\dot{y} + y = 2$

   (ii) $\ddot{y} - \dot{y} - 6y = 18$

   (iii) $\ddot{y} - 2\dot{y} + 2y = 0$

5. Sabemos que a equação diferencial $\ddot{y} - 6\dot{y} + 9y = 0$ tem a solução $y_1(x) = e^{3x}$. Ache uma segunda solução, l.i. em relação à y_1.

6. Resolva completamente a equação: $x\dot{y} + 5y = 8x^3$.

7. Ache uma solução particular das equações diferenciais:

   (i) $\ddot{y} - 2\dot{y} + 3y = 2x^2 + 1$

   (ii) $\ddot{y} - 12\dot{y} - 3y = \operatorname{sen} x$

   (iii) $2\dot{y} - \ddot{y} + 4y = 2e^{3x}$

8. Utilizando o método de Frobenius, ache uma solução da equação diferencial do oscilador harmônico,

$$\ddot{y} + \omega^2 y = 0$$

   (sugestão: escolha $k = 1$ e $a_1 = 0$. Através dos primeiros termos da série, você consegue reconhecer que função é essa? R elembre das expansões em série de MacLaurin para as funções simples, que podem ser encontradas na aula 07 de Métodos de Física Teórica I).

9. Ache uma solução, por expansão em série de potências, da equação diferencial de Legendre,

$$(1 - x^2)\,\ddot{y} - 2x\,\dot{y} + \ell(\ell + 1)\,y = 0\,.$$

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

R espostas de problemas:
(2) $y_G = -2 + Ae^{+2x/5}$.
(3) $y = -2 + 3e^{+2x/5}$.
(4) (i) $y_G = 2 + c_1\,e^x + c_2\,x\,e^x$;
(ii) $y_G = -3 + c_1\,e^{-2x} + c_2\,e^{+3x}$;
(iii) $y_G = y_{GH} = e^x[c_1\,e^{ix} + c_2\,e^{-ix}]$.
(5) $y = xe^{3x}$.
No problema 7, ítem (i), experimente "chutar" uma solução do tipo $y_P = Ax^2 + Bx + C$, substitua na equação diferencial e, comparando os coeficientes dos lados esquerdo e direito de 1, x e de x^2, ache A, B, C. No ítem (ii) tente usar $y = A \operatorname{sen} x + B\,\cos x$. Em (iii) use $y = A\,e^{3x}$.

No problema 8, siga a sugestão de valores de k e a_1, obtenha os três primeiros termos da série. Você consegue reconhecer que função é essa? Relembre das expansões em série de MacLaurin para as funções simples, que podem ser encontradas na aula 07 ou 03 do Curso de Métodos de Física Teórica I.
O problema 9 tem como soluções os polinômios de Legendre, que você pode encontrar no material impresso da aula 05.
Confira a solução do outros problemas com seus colegas!

CONCLUSÃO

Vimos nesta aula técnicas de resolução de equações diferenciais de primeira e segunda ordem. Ocorre que são exatamente estes dois tipos de equações diferenciais os que mais aparecem nos modelos teóricos das várias áreas da física, em particular na mecânica Newtoniana, onde a própria segunda lei de Newton é uma equação diferencial de segunda ordem.

RESUMO

Nesta aula você tomou contato com técnicas básicas de resolução de equações diferenciais ordinárias de primeira e segunda ordens.

PRÓXIMA AULA

Na próxima aula será apresentada a teoria de Sturm-Liouville, que se aplica àquelas equações diferenciais de segunda ordem que estão associadas a operadores diferenciais autoadjuntos.

REFERÊNCIAS

BOYCE, W.E. DIPRIMA, R.C. Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2006.
BRAGA, Carmen. Notas de Física Matemática. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006.
BUTKOV, Eugene. Física Matemática. Rio de Janeiro: LTC Editora, 1988.

Aula
2

Teoria de Sturm-Liouville

METAS

Apresentar a teoria de Sturm-Liouville para as equações diferenciais ordinárias de segunda ordem, que caracteriza as equações correspondentes a operadores autoadjuntos. Analisar a ortogonalidade de funções em relação a produtos escalares diversos; introduzir um método de obtenção de um conjunto ortogonal de funções a partir de um conjunto não-ortogonal relativamente a um produto escalar específico.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá ser capaz de: reconhecer se dada equação diferencial é do tipo Sturm-Liouville ou não; verificar se duas funções são ou não ortogonais segundo um produto escalar especificado; aplicar o procedimento de ortogonalização de Schmidt a um conjunto de funções dado.

PRÉ-REQUISITOS

Espaços lineares, espaços métricos, operadores autoadjuntos.

INTRODUÇÃO

Muitos problemas físicos, quando tratados por métodos da mecânica clássica ou pela teoria quântica, levam a *equações diferenciais de segunda ordem*, geralmente lineares. Isso acontece, por exemplo, em problemas de eletromagnetismo, ou de fluxo de calor. Ou então, em problemas mais sofisticados dentro do âmbito da física quântica, como a solução da equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico, ou o espalhamento quântico de partículas subatômicas por potenciais representando átomos ou núcleos, como no caso do espalhamento de Rutherford. Todos esses problemas, e muitos outros, têm algo importante em comum: são descritos por equações diferenciais tipo Sturm-Liouville, ou seja, estão associadas a operadores autoadjuntos.

Particularmente, as equações diferenciais cujas soluções são as funções especiais estudadas neste curso (polinômios de Legendre, harmônicos esféricos, funções de Bessel, polinômios de Hermite, funções de Laguerre), pertencem à categoria de equações diferenciais de Sturm-Liouville, estando portanto associadas a operadores autoadjuntos. Isto é essencial no contexto da Mecânica Quântica, em que autovalores dos operadores correspondendo a observáveis físicos têm que ser reais, já que estão associados a medidas físicas. Lembre-se, por exemplo, que a equação de Schrödinger é uma equação de autovalores, e os autovalores neste caso representam a energia, portanto devem corresponder a números reais.

2.1 Operador de Sturm-Liouville

Há várias equações diferenciais importantes para nós, físicos, como citamos na introdução, que estão associadas a operadores diferenciais autoadjuntos. Vamos começar com uma equação diferencial muito simples – e talvez uma das mais importantes da Física!

Suponha que uma partícula de massa constante m possa se mover apenas em uma dimensão, isto é, ela se move em cima de um eixo x, sob ação de uma força $F(t)$. A segunda lei de Newton nos permite dizer que:

$$m\,a = F(t)$$

ou

$$m\,\frac{d^2x}{dt^2} - F(t) = 0\,.$$

Esta é uma equação diferencial, uma vez que a função incógnita, $x(t)$, encontra-se dentro de uma derivada. Assim, todo problema da mecânica clássica, em princípio pode ser representado matematicamente por uma equação diferencial.

A própria operação de derivação, na lei de Newton acima, pode ser encarada como um operador que, atuando sobre a função $x(t)$, nos fornece outra função,

$$v(t) = \dot{x}(t) = \frac{dx}{dt}\,.$$

Definimos um operador $\mathcal{L}$, envolvendo derivadas até a segunda ordem, de forma bem geral,

$$\mathcal{L}\,\varphi(x) = a(x)\,\frac{d^2\varphi}{dx^2} + b(x)\,\frac{d\varphi}{dx} + c(x)\varphi\,,$$

onde $a(x)$, $b(x)$, $c(x)$ são funções arbitrárias reais de variável real, definidas no intervalo de interesse $x_1 \leq x \leq x_2$; exige-se que c, db/dx e d^2a/dx^2 sejam contínuas, e $a(x)$ não deve se anular no intervalo (x_1, x_2). Quanto à função $\varphi(x)$, é comum exigimos que tenha quadrado integrável, isto é, que pertença ao espaço de Hilbert $\mathcal{H}$,

$$\mathcal{H} = \left\{ \varphi(x) \text{ tal que } \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2\,dx = M < \infty \right\}\,.$$

Vamos obter uma expressão para o adjunto do operador $\mathcal{L}$. Como vimos em aula anterior, sobre espaços vetoriais, o adjunto $\mathcal{L}^\dagger$ é definido por:

$$(\mathcal{L}\varphi, \psi) = (\varphi, \mathcal{L}^\dagger\psi), \quad \forall\varphi, \psi \in \mathcal{H}\,.$$

Explicitamente, o produto escalar $(.,.)$ é escrito:

$$\begin{aligned}(\mathcal{L}\varphi, \psi) &= \left(a(x)\frac{d^2\varphi}{dx^2} + b(x)\,\frac{d\varphi}{dx} + c(x)\varphi\,,\,\psi\right)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[a(x)\frac{d^2\varphi}{dx^2} + b(x)\,\frac{d\varphi}{dx} + c(x)\varphi\right]\,\psi(x)\,dx\,.\end{aligned}$$

Note bem: como as funções φ, ψ são reais, não aparecem as conjugações complexas que normalmente acompanham a notação do produto escalar.

Essa integral pode ser decomposta em três,

$$\begin{aligned}(\mathcal{L}\varphi, \psi) &= \int_{-\infty}^{\infty} a\frac{d^2\varphi}{dx^2}\psi\,dx + \int_{-\infty}^{\infty} b\frac{d\varphi}{dx}\psi\,dx + \int_{-\infty}^{\infty} c\varphi\psi\,dx\\ &= \left(a\frac{d^2\varphi}{dx^2}, \psi\right) + \left(b\frac{d\varphi}{dx}, \psi\right) + (c\varphi, \psi)\;,\end{aligned}$$

e trabalharemos separadamente com cada uma delas,

$$(c\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} c\varphi\psi\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi c\psi\,dx = (\varphi, c\psi)\;;$$

$$\left(b\frac{d\varphi}{dx}, \psi\right) = \int_{-\infty}^{\infty} b\frac{d\varphi}{dx}\psi\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\overbrace{\frac{d}{dx}}\,\varphi\right]\,[b\psi]\,dx$$

e tentaremos "trocar de posição" a derivada d/dx marcada por uma chave horizontal, que aparece atuando sobre φ na última integral. Para isso, usamos uma integração por partes,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{d\varphi}{dx}\right]\,[b\psi]\,dx = [\varphi b\psi]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\varphi\,\frac{d}{dx}\,[b\psi]\;.$$

Mas, por serem funções de quadrado integrável, φ, ψ se anulam no infinito (queremos dizer, em $\pm\infty$), de modo que o primeiro termo do lado direito se anula, e ficamos com:

$$\left(b\frac{d\varphi}{dx}, \psi\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi\,\left[-\frac{d}{dx}(b\psi)\right]\,dx = \left(\varphi, -\frac{d}{dx}[b\psi]\right)\,.$$

Para a terceira integral aplicamos procedimento parecido, fazendo duas integrações por partes,

$$\begin{aligned}
\left(a\frac{d^2\varphi}{dx^2}, \psi\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} a\frac{d^2\varphi}{dx^2}\,\psi\,dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right] [a\psi]\ dx \\
&= \underbrace{\left[\frac{d\varphi}{dx}a\psi\right]_{-\infty}^{\infty}}_{0} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varphi}{dx}\,\frac{d}{dx}\,[a\psi]\ dx \\
&= \underbrace{\left[\varphi\frac{d}{dx}(a\psi)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{0} + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi\frac{d^2}{dx^2}(a\psi)\,dx \\
&= \left(\varphi, \frac{d^2}{dx^2}[a\psi]\right)\ .
\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
(\mathcal{L}\varphi, \psi) &= \left(\varphi, \left\{\frac{d^2}{dx^2}[a\psi] - \frac{d}{dx}[b\psi] + c\psi\right\}\right) \\
&= \left(\varphi, \mathcal{L}^{\dagger}\psi\right)
\end{aligned}$$

e fica evidenciada a ação do operador adjunto de $\mathcal{L}$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^{\dagger}\psi &= \frac{d^2}{dx^2}(a\psi) - \frac{d}{dx}(b\psi) + c\psi \\
&= a\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(2\frac{da}{dx} - b\right)\frac{d\psi}{dx} + \left(\frac{d^2a}{dx^2} - \frac{db}{dx} + c\right)\ .
\end{aligned}$$

Mas, tínhamos:

$$\mathcal{L}\,\psi = a\,\frac{d^2\psi}{dx^2} + b\,\frac{d\psi}{dx} + c\psi\,,$$

e, comparando com a expressão para o adjunto, teremos que

$$\mathcal{L}\,\psi = \mathcal{L}^{\dagger}\,\psi$$

se e somente se:

$$\dot{a} = \frac{da}{dx} = b\,.$$

Como estudamos no curso de Métodos em Física Teórica I, um operador autoadjunto tem três propriedades muito importantes:

(i) seus autovalores são **reais** (e, portanto, poderiam representar medidas de grandezas físicas);

(ii) seus autovetores (ou melhor, autofunções) são dois a dois **ortogonais** e

(iii) constituem um conjunto **completo**, isto é, podem ser usados como uma base para o espaço das soluções da equação diferencial em questão.

A equação de autovalores para $\mathcal{L}$ pode ser escrita:

$$\mathcal{L}\,\psi(x) + \lambda\,\omega(x)\,\psi(x) = 0\,.$$

Se a equação acima tiver soluções para um determinado λ (que é, então, chamado <u>autovalor</u>), a solução $\psi_\lambda(x)$ é chamada <u>autofunção</u>.

Note a pequena diferença em relação ao estudado no curso de Métodos I, em espaços vetoriais: aqui aparece uma função $\omega(x)$ a mais, ela é chamada "função peso". Se ela for igual a 1, e em muitas equações de autovalores ela assume esse valor, temos válidas as mesmas propriedades vistas naquele curso (MFT I). No caso em que a função peso não seja um, a relação de ortogonalidade das autofunções sofrerá uma alteração, como veremos adiante.

Não é uma coincidência, portanto, que as equações diferenciais que já encontramos pela frente (e outras que ainda estudaremos) sejam da forma:

$$\mathcal{L}\,\psi + \lambda\omega\psi = 0$$

com

$$\mathcal{L}\,\psi = a\,\frac{d^2\psi}{dx^2} + b\,\frac{d\psi}{dx} + c\psi\,,$$

e $b = da/dx$ (condição para que $\mathcal{L}$ seja autoadjunto).

Confira na tabela 2.1 vários exemplos de equações diferenciais, todas muito úteis em física, satisfazendo essas condições – são as chamadas equações diferenciais tipo Sturm-Liouville. Na ordem em que aparecem: equação diferencial do movimento harmônico simples; equação de Legendre; equação associada de Legendre; equação de Bessel; equação de Hermite; equação de Laguerre e equação diferencial associada de Laguerre.

Eq. Difer.	$a(x)$	$b(x)$	$c(x)$	λ	$\omega(x)$
MHS	1	0	0	ω^2	1
Legendre	$1-x^2$	$-2x$	0	$\ell(\ell+1)$	1
Assoc. Leg.	$1-x^2$	$-2x$	$-\frac{m^2}{1-x^2}$	$\ell(\ell+1)$	1
Bessel	x	1	$-\frac{n^2}{x}$	ℓ^2	x
Hermite	e^{-x^2}	$-2xe^{-x^2}$	0	2α	e^{-x^2}
Laguerre	xe^{-x}	$(1-x)e^{-x}$	0	α	e^{-x}
Assoc. Lag.	$x^{k+1}e^{-x}$	$(k+1-x)x^k e^{-x}$	0	$\alpha-k$	$x^k e^{-x}$

Tabela 2.1: Algumas equações diferenciais tipo Sturm-Liouville. R - e pare que, sempre, $b = da/dx$.

Deixe-me mostrar como devemos "ler" os dados dessa tabela 2.1. Vamos tomar como exemplo a equação de Bessel (provavelmente você vai querer conferir com a equação estudada na primeira aula deste curso; lá nós a atacamos com o método de Frobenius).

Escrevemos:

$$\mathcal{L}\psi + \lambda\omega\psi = 0$$

$$a\frac{d^2}{dx^2}\psi + b\frac{d}{dx}\psi + c\psi + \lambda\omega\psi = 0$$

$$x.\frac{d^2}{dx^2}\psi + 1.\frac{d}{dx}\psi - \frac{n^2}{x}\psi + \ell^2 x\psi = 0$$

$$x^2\frac{d^2}{dx^2}\psi + x\frac{d}{dx}\psi - n^2\psi + \ell^2 x^2\psi = 0$$

que é essencialmente a mesma equação diferencial vista na nossa primeira aula,

$$x^2\,\ddot{y} + x\,\dot{y} + (x^2 - n^2)\,y = 0$$

(basta tomar $\ell = 1$).

É necessário, neste ponto, que se faça algumas observações.

Em primeiro lugar, a teoria até aqui apresentada pode ser extendida facilmente para o caso de funções de variáveis complexas, muito embora existam algumas dificuldades em obter as chamadas "extensões autoadjuntas" para alguns operadores satisfazendo:

$$(\mathcal{L}\varphi, \psi) = (\varphi, \mathcal{L}^{\dagger}\psi)$$

apenas sobre um domínio restrito, $\varphi \in \mathcal{D}(\mathcal{L}) \subset \mathcal{H}$. Se o domínio de $\mathcal{L}$ não é o espaço de Hilbert todo, então o domínio de $\mathcal{L}^{\dagger}$ provavelmente também não será $\mathcal{H}$. Pior que isso: a intersecção entre os domínios de $\mathcal{L}$ e $\mathcal{L}^{\dagger}$ pode ser "pequena"; mas esta intersecção seria o domínio em potencial para definir o operador autoadjunto $\mathcal{L} = \mathcal{L}^{\dagger}$, e teríamos achado um operador de fato autoadjunto, mas definido num conjunto muito restrito de funções. Teria que ser buscada, nesses casos, a extensão autoadjunta de $\mathcal{L}$ (se possível, a $\mathcal{H}$ todo). Não exploraremos esse tópico em nosso curso.

Uma segunda observação diz respeito à completeza do conjunto de funções que são soluções da equação diferencial tipo Sturm-Liouville. Para fixar ideias, considere a equação diferencial do movimento harmônico simples, que é obedecida por muitos sistemas físicos, especialmente no limite de pequenas oscilações:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0\,.$$

As soluções são as funções harmônicas, seno e cosseno. De fato, há uma infinidade de soluções, dependendo dos possíveis valores de ω^2. Em particular, se $\omega = n =$ inteiro (isso corresponde, por exemplo, ao caso da partícula quântica presa numa caixa rígida), temos as soluções l.i.:

$$\operatorname{sen} t,\ \cos t,\ \operatorname{sen} 2t,\ \cos 2t,\ \ldots, \operatorname{sen} nt,\ \cos nt,\ \ldots$$

A completeza desse conjunto é devida ao caráter autoadjunto do operador de Sturm-Liouville $\mathcal{L} = d^2/dt^2$, o que significa que aquele conjunto de autofunções pode ser usado como base, e qualquer solução oscilatória (geral!) pode sempre ser escrita:

$$x_G(t) = \sum_{n=0}^{\infty}(a_n\ \cos nt + b_n \operatorname{sen} nt)$$

isto é, na forma de uma série de Fourier. Perceba: a própria existência e o consequente emprego das expansões em série de Fourier estão intimamente ligados ao operador de Sturm-Liouville $\mathcal{L} = d^2/dt^2$.

Vamos também fazer algumas observações sobre a ortogonalidade das autofunções de um operador de Sturm-Liouville, na próxima seção.

2.2 Ortogonalidade das Autofunções

Havíamos visto anteriormente que, nos casos em que a função peso ω valia um, as autofunções associadas a autovalores discretos e distintos eram ortogonais ($\mathcal{L}$ vem a ser, então, um operador completamente contínuo),

$$\left.\begin{array}{l}\psi_i \longleftrightarrow \lambda_i \\ \psi_j \longleftrightarrow \lambda_j\end{array}\right\} \quad \lambda_i \neq \lambda_j \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i(x)\,\psi_j(x)\,dx = \delta_{i,j}\,. \tag{2.1}$$

Mas, quando ω não é um, há uma alteração na relação de ortogonalidade. Por exemplo, para as funções de Laguerre (veja a tabela 2.1), a nova relação de ortogonalidade é escrita assim:

$$\int_0^{\infty} L_n(x)\,L_m(x)\,\underbrace{e^{-x}}_{\omega(x)}\,dx = \delta_{m,n}\,. \tag{2.2}$$

Observe, portanto, que em (2.2) apareceu a função peso ω.

O conjunto de funções $\{L_1(x), L_2(x), \ldots\}$ não é ortogonal no sentido do produto escalar (2.1), mas o é em relação ao outro produto escalar, (2.2).

Suponha que nos seja dado um conjunto de funções como este acima, ortogonal em relação a (2.2), mas não em relação a (2.1). É possível construir um outro conjunto de funções, a partir do conjunto antigo, e que seja ortogonal em relação ao produto escalar (2.1): é o método de ortogonalização de Schmidt, que apresentaremos agora através de um exemplo, que escolhi propositadamente de caráter geométrico, para que você possa "ver" qual a ideia do procedimento.

Suponha que sejam dados três vetores no espaço (espaço real, que denotaremos por $\mathbf{R}^3$),

$$\begin{aligned} \vec{v}_1 &= \vec{i} \\ \vec{v}_2 &= \vec{i} + \vec{j} \\ \vec{v}_3 &= \vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\,. \end{aligned}$$

Não é difícil verificar que $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3\}$ é um conjunto l.i. (você se lembra, do curso de Métodos I, como se faz isso? Talvez seja interessante revisar o conceito!), porém esses vetores não são dois a dois ortogonais, no sentido do produto escalar usual de vetores, que é dado por:

$$\begin{aligned}\vec{v}.\vec{w} &= (v_x\vec{i} + v_y\vec{j} + v_z\vec{k}).(w_x\vec{i} + w_y\vec{j} + w_z\vec{k}) \\ &= v_x w_x + v_y w_y + v_z w_z \\ &= |\vec{v}|\,|\vec{w}|\,\cos\theta\,.\end{aligned}$$

Eles também não são normalizados (com excessão de $\vec{v}_1$): formam uma base de $\mathbf{R}^3$, mas decididamente não é base ortonormal.

O procedimento de ortogonalização de Schmidt consiste em obter novos vetores $\{\vec{w}_1, \vec{w}_2, \vec{w}_3\}$, a partir do conjunto antigo $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3\}$, com os $\vec{w}$'s dois a dois ortogonais.

Para começar, escolhe-se:

$$\vec{w}_1 = \vec{v}_1 = \vec{i}\,.$$

Já para o segundo vetor, parte-se de $\vec{v}_2$, mas subtrai-se dele a parte que está na direção de $\vec{w}_1$ $(= \vec{i})$,

$$\begin{aligned}\vec{w}_2 &= \vec{v}_2 - \left(\vec{v}_2.\frac{\vec{w}_1}{|\vec{w}_1|}\right)\frac{\vec{w}_1}{|\vec{w}_1|} \\ &= \vec{v}_2 - \left(\vec{v}_2.\vec{i}\right)\vec{i} \\ &= (\vec{i} + \vec{j}) - \vec{i} \\ &= \vec{j}\end{aligned}$$

(note que o módulo de $\vec{w}_1$ é $|\vec{w}_1| = \sqrt{\vec{w}_1.\vec{w}_1} = \sqrt{\vec{i}.\vec{i}} = 1$).

Para construir $\vec{w}_3$, toma-se $\vec{v}_3$ e subtrai-se dele as partes que estiverem nas direções de $\vec{w}_1$ $(= \vec{i})$ e $\vec{w}_2$ $(= \vec{j})$,

$$\begin{aligned}\vec{w}_3 &= \vec{v}_3 - \left(\vec{v}_3.\frac{\vec{w}_1}{|\vec{w}_1|}\right)\frac{\vec{w}_1}{|\vec{w}_1|} - \left(\vec{v}_3.\frac{\vec{w}_2}{|\vec{w}_2|}\right)\frac{\vec{w}_2}{|\vec{w}_2|} \\ &= (\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) - \vec{i} - \vec{j} \\ &= \vec{k}\,.\end{aligned}$$

Neste exemplo, aconteceu (acidentalmente) que a nova base já consiste de vetores normalizados,

$$\begin{aligned} \vec{w}_1 &= \vec{i}\,, \\ \vec{w}_2 &= \vec{j}\,, \\ \vec{w}_3 &= \vec{k}\,. \end{aligned}$$

Caso isso não acontecesse, teríamos apenas uma base ortogonal, mas seria possível normalizar os vetores de base, fazendo:

$$\vec{u}_i = \frac{\vec{w}_i}{|\vec{w}_i|}\,, \qquad i = 1,\, 2,\, 3$$

e a base $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3\}$ seria ortonormal.

Exemplo Partindo do conjunto l.i. de funções $\{1, x, x^2, x^3, \ldots\}$, e do produto escalar definido por:

$$(f, g) = \int_{-1}^{+1} f(x)\, g(x)\, dx\,,$$

obtenha um novo conjunto de funções, duas a duas ortogonais, pelo processo de Schmidt. Obtenha explicitamente apenas as três primeiras funções (dica: você deve obter, como solução, funções proporcionais aos polinômios de Legendre).

Para obter um novo conjunto, ortogonal em relação ao produto escalar, fazemos:

$$\begin{aligned} v_1 &= 1\,; \qquad v_2 = x\,; \qquad v_3 = x^2\,; \\ w_1 &= v_1 = 1\,; \\ w_2 &= v_2 - (v_2, \frac{w_1}{|w_1|})\,\frac{w_1}{|w_1|} \\ &= x - (x, 1)\frac{1}{\sqrt{(1,1)}}\frac{1}{\sqrt{(1,1)}} \\ w_3 &= v_3 - (v_3, \frac{w_1}{|w_1|})\,\frac{w_1}{|w_1|} - (v_3, \frac{w_2}{|w_2|})\,\frac{w_2}{|w_2|} \\ &= x^2 - (x^2, 1)\frac{1}{\sqrt{(1,1)}}\frac{1}{\sqrt{(1,1)}} - (x^2, x)\frac{1}{\sqrt{(x,x)}}\frac{x}{\sqrt{(x,x)}} \end{aligned}$$

Precisamos calcular os produtos escalares seguintes:

$$
\begin{aligned}
(1,1) &= \int_{-1}^{+1} 1\, dx = 2\,; \\
(1,x) &= (x,1) = \int_{-1}^{+1} x\, dx = 0\,; \\
(1,x^2) &= (x^2,1) = \int_{-1}^{+1} x^2\, dx = 2/3\,; \\
(x,x) &= \int_{-1}^{+1} x^2\, dx = 2/3\,; \\
(x,x^2) &= (x^2,x) = \int_{-1}^{+1} x^3\, dx = 0\,.
\end{aligned}
$$

Com isso,

$$w_2 = x\,,$$

$$
\begin{aligned}
w_3 &= x^2 - \frac{2}{3}.\frac{1}{2} \\
&= x^2 - \frac{1}{3}\,.
\end{aligned}
$$

Se folhearmos um pouco adiante este livro, veremos que as três funções obtidas são proporcionais aos polinômios de Legendre:

$$w_1 = P_0(x)\,; \quad w_2 = P_1(x)\,; \quad w_3 = \frac{2}{3} P_2(x)\,.$$

Isto aconteceu porque a relação de ortogonalidade envolveu a função peso 1. Num exercício sugerido adiante, você usará outra relação de ortogonalidade, e obterá outro polinômio!

ATIVIDADES

1. Partindo do conjunto l.i. de funções $\{1, x, x^2, x^3, \ldots\}$, e do produto escalar definido por:

$$(f,g) = \int_{-1}^{+1} f(x)\, g(x)\, e^{-x}\, dx\,,$$

obtenha um novo conjunto de funções, ortogonais, pelo método de Schmidt. Obtenha explicitamente apenas as três primeiras funções. (dica: você deve obter, como solução, funções proporcionais aos polinômios de Laguerre).

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

Você deve seguir o último exemplo resolvido, que é bastante semelhante a este problema. A resposta, para você conferir: $w_1 = 1$; $w_2 = x - 1$; $w_3 = x^2 - 4x + 2$.

CONCLUSÃO

Vimos nesta aula que muitas equações diferenciais usadas em física possuem a característica de poderem ser interpretadas como equações de autovalores, onde o operador diferencial é autoadjunto, o que tem como consequências os fatos de que os autovalores serão reais, as autofunções serão ortogonais e constituem um conjunto completo.

RESUMO

Nesta aula você tomou contato com a teoria de Sturm-Liouville, que permite lançar um novo olhar sobre as equações diferenciais ordinárias com a propriedade de estarem associadas a operadores autoadjuntos. Estas equações diferenciais estão presentes com frequência em física, e suas soluções apresentam propriedades interessantes.

PRÓXIMA AULA

Na próxima aula estudaremos o método de separação de variáveis, que permite atacar as equações diferenciais parciais.

REFERÊNCIAS

ARFKEN, George; WEBER, Hans. Física Matemática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.

BRAGA, Carmen. Notas de Física Matemática. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006.